



ИНДУЦИРОВАННЫЙ ШУМОМ ПЕРЕНОС БРОУНОВСКИХ ЧАСТИЦ В СИСТЕМЕ С «ПУЛЬСИРУЮЩИМ» ПЕРИОДИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А. П. Никитин, Д. Э. Постнов

Рассматриваются проблемы нелинейного броуновского движения в системах с «пульсирующим» асимметричным периодическим в пространстве потенциалом. Сравниваются приближенные аналитические результаты и результаты электронного моделирования. Объяснены зависимости средней скорости движения частиц для периодического и случайного (бинарный шум) законов модуляции потенциала.

Введение

Одной из популярных моделей, описывающих молекулярные моторы, является система с «пульсирующим» периодическим потенциалом ([1] и ссылки в ней). Пусть некоторая достаточно крупная молекула совершает тепловое (броуновское) движение около полимера. Благодаря периодичности структуры полимера его электростатическое поле также обладает периодической структурой. Кроме того, из-за несимметричного распределения электрических зарядов в пределах одного периода полимера его поле является еще и асимметричным. Броуновская частица-молекула участвует в обратимой химической реакции [2, 3], в результате которой она приобретает и теряет случайным образом свою электронейтральность, то есть становится и перестает быть заряженной частицей. Когда частица заряжена, она взаимодействует с полем полимера, которое можно аппроксимировать периодическим в пространстве асимметричным потенциалом $V(x)$ (рис. 1). Если частица стала электронейтральной, то она не взаимодействует с полем полимера и для нее можно считать потенциал нулевым. То есть эффективный потенциал для частицы есть

$$U(x,t) = g(t) V(x) = \begin{cases} V(x) \\ \downarrow \uparrow \\ 0. \end{cases}$$

Функция времени $g(t)$ последовательно принимает значения 0 и 1, причем случайным образом.

Появление потока частиц в рассматриваемой системе можно объяснить следующими рассуждениями

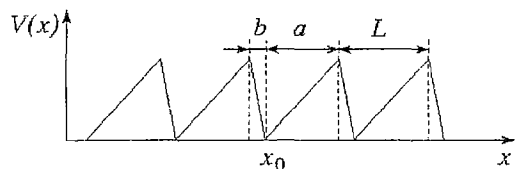


Рис. 1. Пространственно-периодический асимметричный потенциал

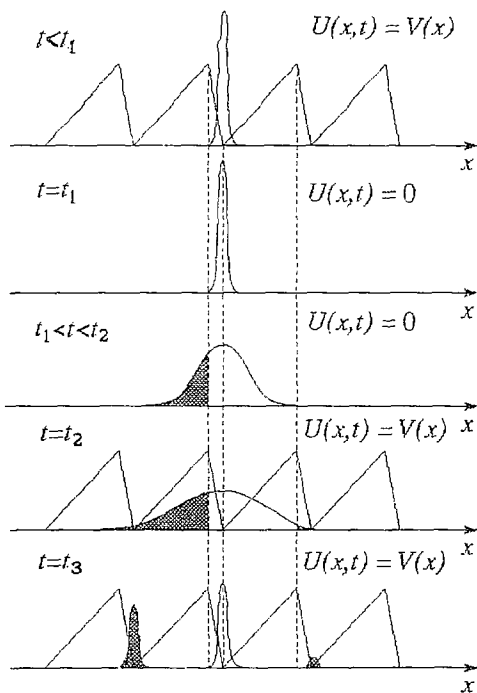


Рис. 2. Эволюция плотности частиц. Плотность $p(x,t)$ изображена для пяти моментов времени, соответствующих разным фазам механизма генерации потока

оказались. Из-за разницы в величине бассейнов притяжений, соответствующих крутым и пологим склонам потенциала, будет иметь место смещение центра масс частиц, причем, в сторону крутого склона. Понятно, если потенциал будет переключаться очень часто, то за короткие времена «выключенного» потенциала тепловые флуктуации не раскидают частицы на достаточное расстояние и они не окажутся в бассейнах притяжения соседних состояний равновесия, вследствие чего поток будет почти нулевым. Также, если потенциал будет переключаться очень редко, то редко будет нарушаться равновесность системы, и поэтому поток будет очень малым. Из этих рассуждений следует «резонансная»² зависимость потока частиц J от частоты переключений f функции $g(t)$.

Сама природа молекулярного движения подсказала ученым и инженерам, занятым в нанотехнологии, способ управления движением молекул [5,3]. Очевидно, если $g(t)$ будет не случайным процессом, а периодической функцией времени, то сам механизм направленного движения сохранится. Этому посвящена экспериментальная работа [5], где периодический потенциал создавался лазерным излучением, в поле которого двигались броуновские частицы. Таким образом возникла задача об исследовании зависимости потока частиц от закона модуляции периодического потенциала. Представленная авторами работа посвящена данной проблеме.

В настоящее время L.P. Faucheux, L.S. Bourdieu, P.D. Kaplan, A.J. Libchaber и др. применяют искусственно созданные системы с «пульсирующим» периодическим потенциалом в нанотехнологии для направленного перемещения и сортировки групп молекул [5,6]. Перспектива такого инженерного применения является стимулом для многих ученых. Кроме того, исследование систем с

(рис. 2). Пусть первоначально включен периодический потенциал и имеется множество не взаимодействующих друг с другом частиц, положение которых характеризуется плотностью $p(x,t)$. Все частицы сначала локализованы в пределах одного периода потенциала около состояния равновесия¹, то есть потенциальные барьеры очень высоки. Пусть теперь в момент времени t_1 потенциал переключился и стал нулевым. Тепловые флуктуации с течением времени раскидают частицы на расстояния, соизмеримые по величине с периодом потенциала L . Распределение частиц вдоль пространственной координаты будет близким к гауссову (см. [4])

$$p(x,t) = \frac{n}{[4\pi D(t-t_1)]^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_1)}\right].$$

Здесь n – среднее число частиц на периоде, D – коэффициент диффузии, x_0 – координата минимума потенциала.

Если снова включится периодический потенциал (в момент времени t_2), то частицы локализуются около состояний равновесия, причем, возле тех, в бассейнах притяжения которых они

¹ Состояние равновесия – минимум потенциала.

² В данном случае под резонансным характером зависимости подразумевается наличие у нее максимума.

«пульсирующим» периодическим потенциалом затрагивает интересы современной медицины.

Для исследования общих свойств систем с «пульсирующим» периодическим потенциалом вовсе не обязательно ставить эксперименты непосредственно на броуновских частицах. В [7,8] показано, как на основе мультстабильного осциллятора типа фазовой автоподстройки частоты (ФАП) можно построить модель с периодическим потенциалом.

На рис. 3 изображены экспериментальные результаты, которые получены на ФАП, когда $g(t)$ представляет собой процесс переключения между 0 и 1. Кривой J_{II} соответствует периодический, а кривой J_{III} — случайный процесс переключения $g(t)$, то есть бинарный шум³. Сравним обе кривые. На высоких частотах f переключения $g(t)$ кривая J_{II}

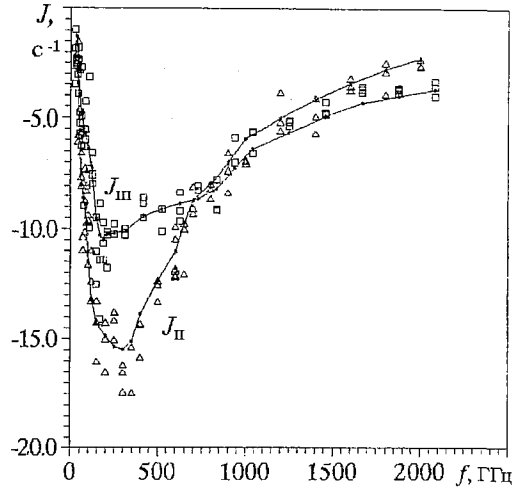


Рис. 3. Зависимость потока от частоты переключения $g(t)$ между 0 и 1 (результат аналогового моделирования). Расстояния, соответствующие пологому и крутому склонам потенциала, составляют 75% и 25% от его периода L

лежит выше кривой J_{III} . Объясним этот экспериментальный факт на языке броуновского движения. Здесь f обозначает частоту периодического переключения $g(t)$ для кривой J_{II} и среднюю частоту случайных переключений $g(t)$ для кривой J_{III} . Случайный процесс $g(t)$ обладает широким спектром времен пребывания в состояниях 0 и 1, кратных T_0 — минимальному времени между двумя переключениями $g(t)$ (рис. 4), в то время как периодическому процессу $g(t)$ будет соответствовать только одно характерное время T_0 . Следовательно, как показано выше, за короткие времена T_0 «выключенного» потенциала тепловые флуктуации не раскидают частицы на достаточное расстояние, и они не окажутся в бассейнах притяжения соседних состояний равновесия. Для периодического переключения $g(t)$ поток будет близким к нулевому. Для случайного процесса из-за присутствия в его спектре времен пребывания в состояниях 0 и 1 компонентов с достаточно длительным временем nT_0 механизм генерации потока будет продолжать работать. В этом случае поток будет больше по абсолютной величине, чем при периодическом процессе переключений $g(t)$. Подкроем это рассуждение математическими выкладками.

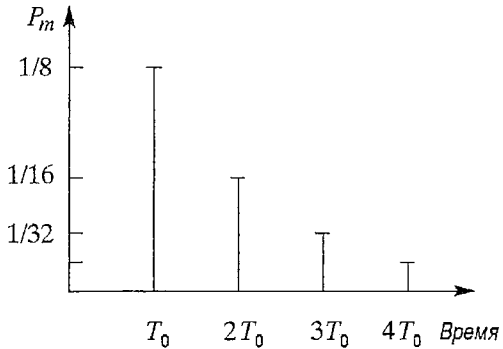


Рис. 4. Спектр времен пребывания

1. Поток частиц при периодической модуляции потенциала

Будем предполагать, что плотность частиц $\mathcal{P}(x,t)$ является периодической функцией координаты x

³ См. определение бинарного шума ниже.

$$\mathcal{P}(x,t) = \mathcal{P}(x+L,t)$$

и нормирована на единицу на периоде потенциала L ($n = 1$). Периодической модуляции потенциала $U(x,t)$ соответствует периодическое переключение функции $g(t)$ между нулем и единицей

$$U(x,t) = g(t) V(x) = \begin{cases} V(x) \\ \downarrow \uparrow \\ 0. \end{cases}$$

Пусть в течение времени T_0 функция $g(t) = 1$, а в течение следующего интервала времени T_0 функция $g(t) = 0$. Следовательно, период процесса переключения составляет $2T_0$, и ему соответствует частота повторения переключений

$$f = 1/(2T_0).$$

Считаем высоту потенциальных барьеров настолько большой, что за интервал времени T_0 при $U(x,t) = V(x)$ все частицы собираются в минимумах потенциала, и их распределение можно аппроксимировать δ -функциями Дирака

$$\mathcal{P}(x,t_1) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0 - iL).$$

С момента t_1 выключения периодического потенциала ($U(x,t) = 0$) плотность частиц эволюционирует и к моменту времени $t_1 + T_0$ принимает вид

$$\mathcal{P}(x,t_1+T_0) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} p_i(x,t_1+T_0),$$

где

$$p_i(x,t_1+T_0) = \frac{n}{(4\pi DT_0)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - iL)^2}{4\pi DT_0} \right].$$

Найдем число частиц, покинувших пределы i -й потенциальной ямы (см. рис.1 и 2) в сторону возрастающих значений координаты x ,

$$G_1 = \int_{x_0+a}^{+\infty} p_i(x,t_1+T_0) dx.$$

Аналогичным способом найдем число частиц, покинувших пределы одной потенциальной ямы в сторону убывающих значений координаты x ,

$$G_2 = \int_{-\infty}^{x_0-b} p_i(x,t_1+T_0) dx.$$

За следующий интервал времени T_0 (при включенном потенциале) все частицы соберутся в минимумах $V(x)$. То есть произойдет смещение центра масс частиц. Далее весь процесс повторится снова. Определим поток частиц в единицу времени в условиях периодической модуляции потенциала как

$$J_n = 1/(2T_0) (G_1 - G_2).$$

Расчеты по этой формуле показывают, что зависимость J_n от частоты имеет

⁴ Далее будут рассматриваются только те частицы, которые в момент выключения потенциала находились в пределах одного его i -ого периода. Полная плотность частиц $\mathcal{P}(x,t)$ будет складываться из множества плотностей $p_i(x,t)$ аналогичных $p(x,t)$ (см. рис.2), смещенных относительно друг друга вдоль x на величины кратные периоду потенциала.

«резонансный» характер, то есть существует некоторое оптимальное значение частоты f , при котором абсолютная величина потока $|J_n|$ максимальна. Аналогичный результат получен в [5]

2. Поток частиц при модуляции потенциала бинарным шумом

2.1. Бинарный шум. Определение. Бинарный шум⁵ – это дискретный случайный процесс $g(t)$, имеющий два возможных состояния 1 и 0, причем смена состояний возможна только в фиксированные моменты времени $t_k = \Delta \pm kT_0$, где $T_0 = \text{const}$, $k=0, 1, 2, \dots$ – целое неотрицательное число, Δ – случайная величина, не зависящая от $g(t)$ и равномерно распределенная на отрезке $[0, T_0]$ [9].

То есть под бинарным шумом мы будем понимать случайную последовательность нулей и единиц. В этой последовательности смена нулей на единицы и обратно происходит случайно в моменты t_k (рис. 5). При равной вероятности появления символов можно показать, что после единицы с вероятностью $P_{1,1} = 1/2$ появится единица, и с вероятностью $P_{1,0} = 1/2$ появится ноль. Аналогично $P_{0,1} = P_{0,0} = 1/2$. В большой последовательности длительностью NT_0 содержится примерно одинаковое число нулей и единиц. В ней последовательность символов «1,0,1» встречается с вероятностью

$$P_{1,0} P_{0,1} = 1/2 \cdot 1/2 = 1/4.$$

Последовательность символов «1,0,0,1» встречается с вероятностью

$$P_{1,0} P_{0,0} P_{0,1} = 1/2 \cdot 1/2 \cdot 1/2 = 1/2^3.$$

Далее, рассматривая серии из нулей и единиц, увидим, что серия из m нулей (единиц) будет встречаться с вероятностью

$$P_m = 1/2^{m+1}.$$

Следовательно, в большой последовательности длительностью NT_0 содержится в среднем

$$(N/m)P_m = N/(m2^{m+1})$$

серий из m нулей (единиц). Общее число всех таких серий нулей (единиц) равно

$$K = \sum_{m=1}^N (N/m)P_m = \sum_{m=1}^N N/(m2^{m+1}).$$

Определим среднюю частоту переключений бинарного шума как

$$\begin{aligned} f_{\text{cp}} &= K/(NT_0) = 1/(NT_0) \sum_{m=1}^N (N/m)P_m = 1/(NT_0) \sum_{m=1}^N N/(m2^{m+1}) = \\ &= (1/T_0) \sum_{m=1}^N 1/(m2^{m+1}). \end{aligned}$$

Ряд очень быстро сходится. Можно считать, что выполняется соотношение

$$f_{\text{cp}} \approx 1/(3T_0).$$

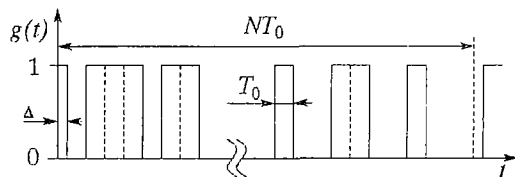


Рис. 5. Реализация бинарного шума

⁵ Другое название – квазислучайный телеграфный сигнал.

2.2. Модуляция потенциала бинарным шумом. В отличие от случая периодической модуляции потенциала поток при бинарном шуме будет складываться из потоков J_m , соответствующих сериям из m нулей,

$$J_m = 1/(mT_0)(G_{1,m} - G_{2,m}),$$

где $G_{1,m}$ – число частиц, покинувших пределы одной потенциальной ямы в сторону возрастающих значений координаты x за время mT_0 ,

$$G_{1,m} = \int_{x_0+a}^{+\infty} p_i(x, mT_0) dx,$$

$G_{2,m}$ – число частиц, покинувших пределы одной потенциальной ямы в сторону убывающих значений координаты x за время mT_0 ,

$$G_{2,m} = \int_{-\infty}^{x_0-b} p_i(x, mT_0) dx.$$

За интервал времени mT_0 с момента t_1 выключения периодического потенциала ($U(x,t) = 0$) закон распределения плотности выделенных нами частиц (см. раздел 1) приобретает вид

$$p_i(x, mT_0) = \frac{n}{(4\pi DmT_0)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - iL)^2}{4DmT_0} \right].$$

Суммарный поток $J_{\text{ш}}$ складывается из потоков J_m с учетом их вероятностей (вероятностей встретить в случайной последовательности бинарного шума серии из m нулей)

$$J_{\text{ш}} = \sum_{m=1}^{\infty} J_m P_m = (1/T_0) \sum_{m=1}^{\infty} (G_{1,m} - G_{2,m}) / (m2^{m+1}).$$

Зависимость потоков $J_m P_m$ от средней частоты $f_{\text{ср}}$ переключения бинарного шума представлена на рис. 6, а потоки $J_{\text{ш}}$, J_{II} – на рис. 7.

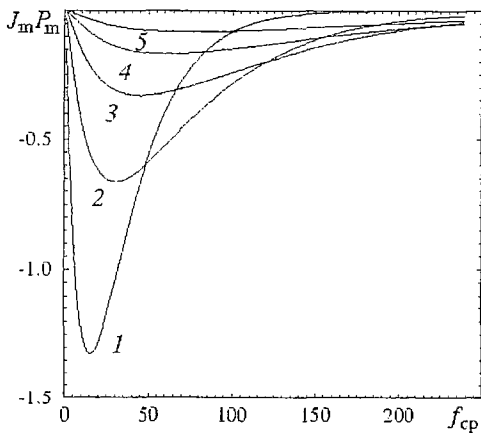


Рис. 6. Зависимость потоков $J_m P_m$ от средней частоты переключения бинарного шума (аналитический результат представлен в безразмерных координатах); показаны первые пять потоков: 1 – $J_1 P_1$; 2 – $J_2 P_2$; 3 – $J_3 P_3$; 4 – $J_4 P_4$; 5 – $J_5 P_5$

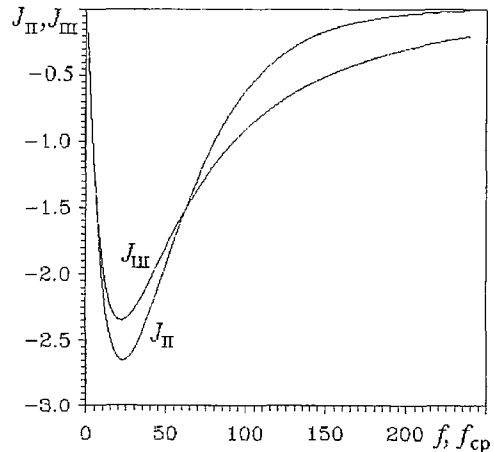


Рис. 7. Зависимость потоков от частоты переключения $g(t)$ между 0 и 1 (аналитический результат представлен в безразмерных координатах). Расстояния, соответствующие пологому и крутому склонам потенциала, составляют 75% и 25% от его периода L ; коэффициент диффузии $D=1$; длина периода потенциала $L = 1$

Выводы

В данной работе рассмотрено поведение броуновских частиц в периодическом асимметричном потенциале в приближении высоких потенциальных барьеров. Экспериментальные исследования проводились путем моделирования броуновского движения системой фазовой автоподстройки частоты. Кроме того, получены приближенные аналитические выражения для потока частиц. Наблюдается хорошее качественное совпадение экспериментальных и теоретических результатов (см. рис. 3 и 7). Зависимость потока от частоты как для периодической модуляции потенциала, так и для модуляции бинарным шумом имеет «резонансный» характер. То есть существует некоторое оптимальное значение частоты, при котором абсолютная величина потока максимальна. Причем положения максимумов по оси частот совпадают, а максимум у кривой, соответствующей периодической модуляции потенциала, J_{II} больше, чем у кривой, соответствующей модуляции бинарным шумом, J_{III} . Кроме того, на высоких частотах кривая J_{II} лежит выше кривой J_{III} . В настоящей работе этому факту найдено объяснение. С ростом частоты поток при модуляции потенциала бинарным шумом спадает медленнее, чем при модуляции периодическим сигналом. Это связано с широким спектром времен пребывания функции $g(t)$ в состояниях 1 и 0. Если периодический сигнал обладает только одним характерным временем T_0 , которое может быть оптимальным с точки зрения генерации максимального потока, то у бинарного шума таких времен mT_0 счетное множество. То есть в спектре времен пребывания (см. рис. 4) бинарного шума есть много компонентов с достаточно длительными временами для того, чтобы активно участвовать в механизме генерации потока при малых значениях T_0 . Следовательно, данный механизм для бинарного шума будет работать и на высоких частотах (см. рис. 6), в то время как для периодического сигнала рассмотренный механизм становится уже неэффективным.

Авторы выражают благодарность А.Н. Малахову за интерес к работе и ценные замечания.

Работа частично была поддержана Госкомвузом России по фундаментальному естествознанию (грант 95-0-8.3-66) и Российско-германским грантом DFG и RFFI 436 RUS 113/334/0(R).

Библиографический список

1. Никитин А.П. Индуцированный шумом перенос броуновских частиц в стохастических системах с асимметричным периодическим в пространстве потенциалом // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. 1997. Т.5, № 1. С. 30.
2. Astumian R. D., Bier M. Fluctuation Driven Ratchets: Molecular Motors // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 72. P. 1766.
3. Prost J., Chauwin J.-F., Peliti L., Ajdari A. Asymmetric Pumping of Particles // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 72. P. 2652.
4. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках / Пер. с англ. М.: Мир, 1986.
5. Faucheux L. P., Bourdieu L. S., Kaplan P. D. and Libchaber A. J. Optical Thermal Ratchet // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 1504.
6. Rousselet J., Salome L., Ajdari A. and Prost J. // Nature. 1994. Vol. 370. P. 113.
7. Постнов Д. Э., Никитин А. П., Анищенко В. С. Управление потоком вероятности в системе фазовой автоподстройки частоты // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22, вып. 9. С. 24.
8. Postnov D. E., Nikitin A. P., Balanov A. G., Anishchenko V. S. Symmetric and asymmetric hopping dynamics in noisy electronic circuits // Book of abstracts. The Inter-

national Conference on Nonlinear Dynamics and Chaos (ICND-96), Saratov, Russia, July 8 – 14, 1996, p. 195.

9. Тихонов В.И., Миронов М.А. Марковские процессы. М.: Сов.радио, 1977.

Саратовский государственный
университет

Поступила в редакцию 29.10.97

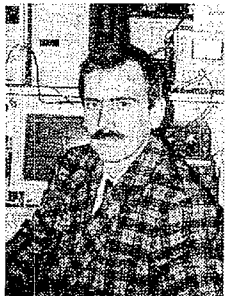
NOISE-INDUCED TRANSPORT OF BROWNIAN PARTICLES IN SYSTEM WITH SPATIALLY PERIODIC FLASHING POTENTIAL

A.P.Nikitin, D.E.Postnov

In the present paper the problems of nonlinear Brownian motion in a periodic non-symmetric flashing potential (ratchet) are considered. The analytical result and the result of analogue simulation are compared. Plots of average velocity versus frequency are explained for periodic and stochastic (the binary noise) laws of potential flashing.



Никитин Александр Петрович – родился в Саратове (1973). Окончил физический факультет Саратовского государственного университета (1995). Аспирант кафедры радиофизики СГУ. Область научных интересов – броуновское движение в нелинейных системах. Автор 4 работ в центральной печати.



Постнов Дмитрий Энгелевич в 1983 году окончил физический факультет Саратовского государственного университета по специальности «радиофизика и электроника», до 1987 года – инженер кафедры радиофизики СГУ. В 1990 году окончил аспирантуру при той же кафедре, защитив кандидатскую диссертацию «Регулярные и хаотические процессы в системах взаимодействующих нелинейных осцилляторов». С 1991 года работал старшим преподавателем кафедры радиофизики Саратовского университета, с 1995 года занимает должность доцента на той же кафедре. Автор 25 научных работ, опубликованных в отечественной и зарубежной печати.